

ВЛИЯНИЕ ТОПОЛОГИИ МАГНИТНОГО ПОЛИМЕРА НА ЕГО СТРУКТУРНЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

Гупало М.А., Новак Е.В.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: marinakashpyrova@list.ru

THE EFFECT OF THE TOPOLOGY OF A MAGNETIC POLYMER ON ITS STRUCTURAL AND MAGNETIC PROPERTIES

Gupalo M.A.^{1*}, Novak E.V.¹

Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

Annotation. In this paper, we investigate the dispersions of magnetic polymers by molecular dynamics method. We considered four types of magnetic polymers: chain, ring, X- and Y-structures. We have studied the behavior of the initial magnetic susceptibility and conducted cluster analysis to obtain full information about the structural properties of magnetic polymers in the systems under study.

В настоящее время исследование магнитных полимеров - аналогов полимерных цепей из магнитных наноразмерных частиц, сшитых полимерными молекулами - представляет большой интерес. Согласно недавним исследованиям [1], с помощью магнитных полимеров можно создавать так называемые “умные материалы”, поведение которых контролируется магнитным полем.

Основной целью работы является исследование дисперсии магнитных полимеров, состоящих из монодисперсных частиц сферической формы, одинаковой топологии, а также различных топологий вместе взятых. Предметом исследования являются магнитные полимеры следующих конфигураций: открытая цепочка, замкнутое кольцо и структуры виды “X” и “Y”.

Методами молекулярной динамики в программном пакете ESPResSo [2] нами были проведены компьютерные эксперименты в безразмерных единицах при различных параметрах дипольного момента и концентрации частиц. Мы исследовали поведение начальной магнитной восприимчивости, а также провели кластерный анализ для получения полной информации об образованных структурах в магнитных полимерах.

1. Sánchez et al., Magnetic filament brushes: tuning the properties of a magnetoresponsive supramolecular coating, Faraday Discuss. 186, 241 (2016).
2. H.J. Limbach et al., ESPResSo – an extensible simulation package for research on soft matter systems, Comput. Phys. Commun. 174 (9) (2006).